

## ТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ

УДК 538.9

### МОЛЕКУЛЯРНО ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭВОЛЮЦИИ СТРУКТУРЫ ПУЧКА УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК

Д. У. Абдуллина<sup>1</sup>, Е. А. Корзникова<sup>2</sup>, С. В. Дмитриев<sup>3</sup>

<sup>1</sup>dina. Abdullina25@gmail.com, <sup>2</sup>elena.a.korznikova@gmail.com, <sup>3</sup>dmitriev.sergey.v@gmail.com

ФГБОУ ВО «Уфимский университет науки и технологий» (УУНИТ)  
Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН, Россия

**Аннотация.** Углеродные нанотрубки (УНТ) обладают уникальным сочетанием физических и механических свойств, что делает их привлекательными для ряда применений. Исследование механического отклика пучка УНТ в условиях плоской деформации (одноосное и двухосное поперечное сжатие), поскольку он может использоваться в качестве упругого демпфера для защиты от вибрации и ударов. В данной работе с помощью цепной модели с уменьшенным числом степеней свободы исследуется поведение пучка УНТ при одноосном боковом сжатии. Квазистатическое нагружение используется для расчета упругих постоянных пучка. Динамическое нагружение выявляет распространение ударных волн двух типов: более быстрое распространяется со скоростью продольного звука и вызывает незначительную деформацию поперечных сечений УНТ, а второе распространяется примерно в три раза медленнее и приводит к схлопыванию УНТ.

**Ключевые слова:** пучок углеродных нанотрубок; условия плоской деформации; боковое сжатие, упругий демпфер; a bundle of carbon nanotubes; plane deformation conditions; lateral compression, elastic damper.

#### ВВЕДЕНИЕ

Углеродные нанотрубки (УНТ) притягиваются друг к другу относительно слабыми силами Ван-дер-Ваальса и могут создавать молекулярные кристаллы, также называемые пучками УНТ [1]. Пучки УНТ могут быть получены различными способами [2]. Они обладают превосходными механическими свойствами, поскольку отдельные УНТ имеют очень высокий предел прочности при растяжении в диапазоне от 11 до 63 ГПа, модуль Юнга при растяжении от 1,0 до 1,3 ГПа и высокую деформацию до разрушения около 10% [3]. Кроме того, УНТ гибкие, легкие, имеют хорошие тепловые и электрические проводники; поэтому они могут быть предложены для ряда приложений [4]. Наиболее важными механическими приложениями УНТ являются высокопрочные канаты [5], волокна [6], композиты с полимерной и металлической матрицей [12, 13], твердые смазочные материалы [8], ударопрочные конструкции [9], и т. д.

Компьютерное моделирование способствует лучшему пониманию физических и механических свойств пучков УНТ. Оболочечная модель была использована для описания ансамбля УНТ различной морфологии. Применимость моделей пучка, пластины и оболочки для анализа механических свойств наноматериалов была проанализирована в [10, 11]. УНТ, диаметр которых превышает пороговое значение, могут находиться как в круглом, так и в свернутом состоянии. Для исследования механического отклика пучков УНТ были разработаны нелинейные крупнозернистые потенциалы. Для уменьшения количества степеней свободы, учитываемых при моделировании некоторых  $sp^2$ -углеродных наноструктур, была разработана цепная модель. Эта модель была успешно применена для моделирования структуры и свойств складок

и свитков углеродных нанолент и поверхностных рипплокаций. В работах [12,13] цепная модель была распространена на исследование УНТ при боковом сжатии в условиях плоской деформации. Демпфирующие свойства пучка УНТ описаны в [14]. Механические свойства и фазовые переходы в пучке УНТ при боковом сжатии проанализированы в [15-16]. Скрученные графеновые наноленты демонстрируют повышенное сопротивление осевому сжатию. Уединенные волны и ударные волны в наноматериалах также были проанализированы, хотя динамические проблемы остаются гораздо менее изученными.

До сих пор цепная модель использовалась для анализа статического нагружения пучков УНТ, а в этой работе мы также рассматриваем динамическое нагружение (ударное сжатие).

#### МЕТОДИКА

Вычислительная модель, использованная в этом исследовании, схематически показана на рисунке 1. Пучок нанотрубок выровнен вдоль оси  $z$ , и УНТ одинакового диаметра создают в поперечном сечении треугольную решетку; они пронумерованы индексами  $i = 1, \dots, I$  и  $j = 1, \dots, J$  (показан случай  $I = J = 2$ ). Для простоты рассматриваются только зигзагообразные УНТ. Атомы углерода движутся в плоскости  $(x, y)$ , и каждый атом представляет собой жесткий ряд атомов, ориентированных перпендикулярно плоскости  $(x, y)$ . Внутри каждой УНТ атомы углерода нумеруются индексом  $n = 1, \dots, N$  против часовой стрелки, начиная с атома с максимальной координатой  $x$ . Таким образом, общее количество атомов в расчетной ячейке составляет  $I \times J \times N$ . Позиции атомов определяются радиус-векторами  $r_{ijn} = (x_{ijn}, y_{ijn})$ . Ставятся периодические граничные условия.

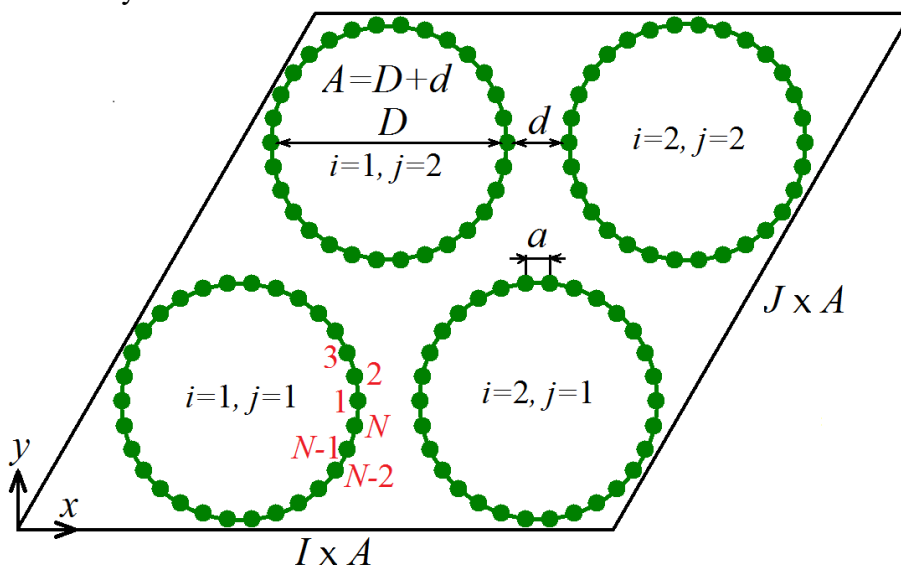


Рис. 1. Схема вычислительной ячейки, включающей УНТ  $I \times J$  ( $I=10, J=12$  в этой работе и  $I=J=2$  на этом рисунке), пронумерованной индексами  $i = 1, \dots, I$  и  $j = 1, \dots, J$ . Углеродные нанотрубки в поперечном сечении образуют треугольную решетку. Атомы имеют две степени свободы, составляющие вектора смещения в плоскости  $(x, y)$ . Цепочки атомов, нормальные к плоскости  $(x, y)$ , движутся как твердые тела.

Межатомное расстояние в графене  $\rho = 1.418 \text{ \AA}$ . Расстояние между соседними атомными рядами в зигзагообразной УНТ составляет  $a = \rho\sqrt{3}/2 = 1.228 \text{ \AA}$ , и это расстояние между атомами в модели цепочки (см. рис. 1). Диаметр углеродных нанотрубок составляет  $D = a / \sin(\pi/N)$ . Пусть  $d$  - кратчайшее расстояние между стенками УНТ, тогда расстояние между центрами соседних УНТ составляет  $A = D + d$ . Сторонами вычислительной ячейки в форме параллелограмма являются  $I \times A$  и  $J \times A$ . В наших моделях рассматриваем УНТ с  $N = 30$  и имеющим диаметр  $D = 11,75 \text{ \AA}$  и равновесным значением  $d = 3,088 \text{ \AA}$ , что можно сравнить с межплоскостное расстояние графита равно  $3,3 \text{ \AA}$ .

УНТ достаточно большого диаметра могут иметь как цилиндрическую, так и сжатую равн



овесную конфигурацию. В настоящей работе мы рассматриваем УНТ относительно небольшого диаметра ( $N = 30, D = 11,75 \text{ \AA}$ ), которые в ненагруженном состоянии имеют только круговое стабильное состояние.

**РЕЗУЛЬТАТЫ**

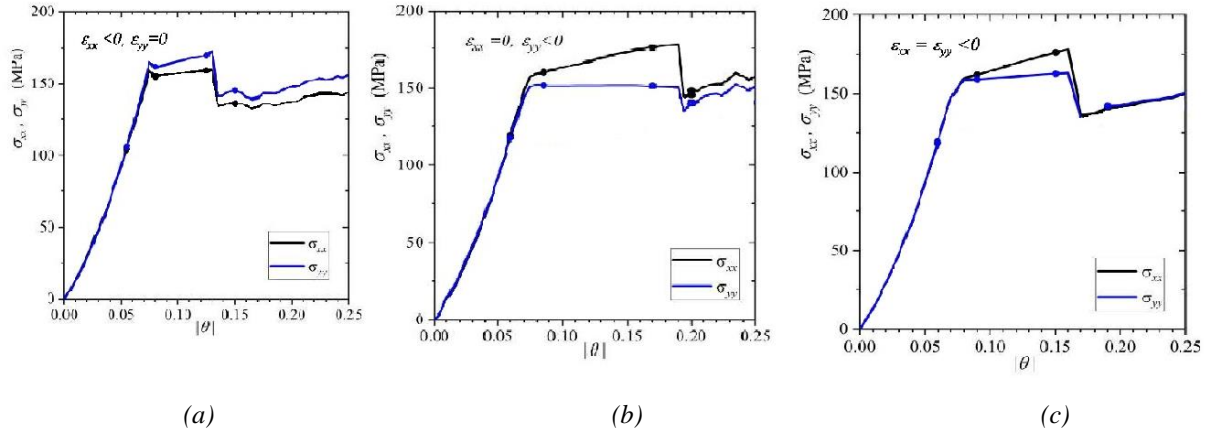


Рис. 2. Компоненты напряжения как функции абсолютного значения объемной деформации,  $|\theta|=|\epsilon_{xx}+\epsilon_{yy}|$ , для случая одноосного сжатия по оси  $x$  (рис. 2a); для одноосного сжатия по оси  $y$  (рис. 2b) и для двухосного сжатия (рис. 2c). Синий и черный цвета используются для  $\sigma_{xx}$  и  $\sigma_{yy}$  соответственно. Нагрузка и разгрузка показаны сплошной и пунктирной линиями соответственно.

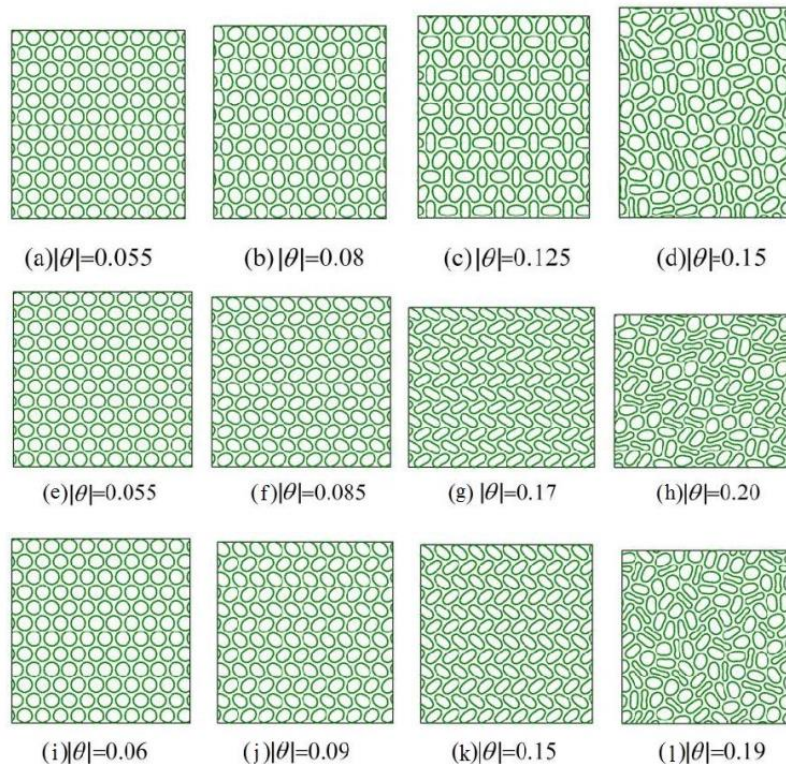


Рис. 3. Структура пучка УНТ при различных абсолютных значениях объемной деформации  $|\theta|=|\epsilon_{xx}+\epsilon_{yy}|$ , для случая одноосного сжатия по оси  $x$  (верхний ряд), для одноосного сжатия по оси  $y$  (средний ряд) и для двухосного сжатия (нижний ряд).

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Кривые растяжения, представленные на рис. 2, выглядят одинаково для всех трех исследованных схем нагружения, хотя можно заметить некоторые различия. При сжатии от исходного состояния примерно до  $|\theta|=0,07$  составляющие напряжения  $\sigma_{xx}$  и  $\sigma_{yy}$  практически равны. Это ожидается для случая двухосной нагрузки из-за гексагональной симметрии конструкции. С другой стороны, это совершенно необычно для одноосного нагружения упругого тела. Равенство  $\sigma_{xx} = \sigma_{yy}$  означает, что в данном режиме деформирования коэффициент Пуассона пучка УНТ при боковом сжатии практически равен 1, что находится на границе термодинамической устойчивости двумерного упругого материала. При  $|\theta|<0,07$  структура пучка УНТ очень постоянна, все УНТ имеют одинаковую слегка деформированную форму поперечного сечения, причем это справедливо как для нагрузки, так и для разгрузки. Примитивная трансляционная ячейка кристаллов УНТ в этом режиме включает одиночные УНТ.

Когда при нагружении величина деформации превышает порог около 7 %, начинают происходить структурные изменения и нарушается равенство между составляющими нормального напряжения из-за возникновения фазового перехода второго рода. При сжатии по оси  $x$  удвоение периода в обоих направлениях приводит к примитивной трансляционной ячейке, включающей четыре УНТ, см. рис. 3 (верхний ряд). При сжатии вдоль оси ординат и при двухосном сжатии происходит удвоение периода в одном направлении, и примитивная трансляционная ячейка включает две УНТ, см. рис. 3 (средний и нижний ряды). В этом режиме все УНТ имеют эллиптическое несхлопнувшееся поперечное сечение для всех трех схем нагружения. Что касается компонент нормального напряжения в этом режиме, то при сжатии вдоль оси  $x$   $\sigma_{xx} < \sigma_{yy}$ , а при сжатии вдоль оси  $y$  и двухосном сжатии. При нагружении появление УНТ со схлопнувшимся поперечным сечением сопровождается внезапным падением компонент нормального напряжения (фазовый переход первого рода). Это падение имеет место при  $|\theta|=0,13, 0,19$  и  $0,16$  в случае сжатия по оси  $x$ , оси  $y$  и двухосного сжатия соответственно. Дальнейшее сжатие после сброса напряжения приводит к увеличению напряжения и увеличению доли разрушившихся УНТ. При разгрузке, примерно при  $|\theta|=0,06$ , для всех трех схем нагружения структура пучков УНТ становится постоянной, так что полная разгрузка приводит к полному восстановлению исходной структуры. Различие структуры, наблюдаемое в определенном интервале деформации при одинаковых значениях деформации при нагрузке и разгрузке, является причиной появления петель гистерезиса, которые можно увидеть на рис. 2. Площадь петли дает энергию, рассеиваемую конструкцией за один цикл нагрузки-разгрузки. Эта энергия максимальна при сжатии по оси  $y$  и минимальна при нагружении по оси абсцисс. Можно заключить, что пучок УНТ при боковом сжатии действует как абсолютно упругий демпфер. Эффективность поглощения энергии максимальна при сжатии пучка УНТ перпендикулярно плотноуложенным рядам и является промежуточной при двухосном сжатии. Практическое проектирование упругих демпферов на основе пучков УНТ требует дальнейших исследований. В частности, важно анализировать влияние диаметра УНТ. Также во многих случаях производятся пучки многослойных УНТ. Заманчиво исследовать, являются ли они более эффективными поглотителями энергии по сравнению с однослойными УНТ. Эти проблемы станут темами будущих исследований. Изучение новых 2D-наноматериалов, аналогичных графену, также имеет большое значение для разработки наноразмерных демпферов.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Tersoff J., Ruoff R. S., Physical Review Letters // 73, 1994, 676-679.
2. Rakov E. G., Russian Chemical Reviews // 82, 2013, 538-566.
3. Yu M-F., Journal of Engineering Materials and Technology // 126, 2004, 271-278.
4. Yao X., Hawkins S. C., Falzon B. G., Carbon // 136, 2018, 130-138.
5. Yu M-F, Files B. S., Arepalli S., Ruoff R. S., Physical Review Letters // 84, 2000, 5552-5555.
6. Bai Y., Zhang R., Ye X., Zhu Z., Xie H., Shen B., Cai D., Liu B., Zhang C., Jia Z., Zhang S., Li X., and Wei F., Nature Nanotechnology // 13, 2018, 589-595.

7. Bakshi S. R., Lahiri D. and Agarwal A., International Materials Reviews // 2010. 55 41-64.
8. Reinert L., Lasserre F., Gachot C., Grützmacher P., Maclucas, Souza N., Mücklich F. and Suarez S., Scientific Reports // 7, 2017, 42873.
9. Randjbaran E., Majid D. L., Zahari R., Sultan M. T. H. and Mazlan N., Facta Universitatis Series: Mechanical Engineering // 18, 2020, 229.
10. Rafii-Tabar H., Ghavanloo E. and Fazlzadeh S. A., Phys. Rep. // 638, 2016, 1.
11. Harik V. M., Solid State Commun. // 120, 2001, 331.
12. Korznikova E. A., Rysaeva L. K., Savin A. V., Soboleva E. G., Ekomasov E. G., Ilgamov M. A. and Dmitriev S. V., Materials // 12, 2019, 3951.
13. Abdullina D. U., Korznikova E. A., Dubinko V. I., Laptev D. V., Kudreyko A. A., Soboleva E. G., Dmitriev S. V. and Zhou K., Computation // 8, 2020, 27.
14. Rysaeva L. K., Korznikova E. A., Murzaev R. T., Abdullina D. U., Kudreyko A. A., Baimova J. A., Lisovenko D. S. and Dmitriev S. V., Facta Universitatis Series: Mechanical Engineering // 18, 2020, 1.

#### ОБ АВТОРАХ

**АБДУЛЛИНА Дина Ураловна**, магистрант 2-го курса ИАТМ.

**КОРЗНИКОВА Елена Александровна**, профессор, зав. каф. МиФМ ИАТМ.

**ДМИТРИЕВ Сергей Владимирович**, Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН, Россия

#### METADATA

**Title:** Molecular dynamics simulation of the evolution of the carbon nanotube beam structure.

**Affiliation:** Ufa University of Science and Technology (UUST), Russia.

**Email:** <sup>1</sup> dina.Abdullina25@gmail.com, <sup>2</sup> elena.a.korznikova@gmail.com, <sup>3</sup> dmitriev.sergey.v@gmail.com.

**Language:** Russian.

**Source:** Molodezhnyj Vestnik UGATU (scientific journal of Ufa University of Science and Technology), no. 1(27), pp. 5-9, 2023. ISSN 2225-9309 (Print).

**Abstract:** Carbon nanotubes (CNTs) have a unique combination of physical and mechanical properties, which makes them attractive for a number of applications. Study of the mechanical response of a CNT beam under plane deformation conditions (uniaxial and biaxial transverse compression), since it can be used as an elastic damper to protect against vibration and shock. In this work, using a chain model with a reduced number of degrees of freedom, we study the behavior of a CNT bundle under uniaxial lateral compression. Quasi-static loading is used to calculate the elastic constants of the beam. Dynamic loading reveals the propagation of shock waves of two types: the faster one propagates at the speed of longitudinal sound and causes slight deformation of the CNT cross sections, while the second one propagates approximately three times slower and leads to the collapse of the CNT.

**Key words:** a bundle of carbon nanotubes; plane deformation conditions; lateral compression, elastic damper.

#### About authors:

**ABDULLINA, Dina Uralovna**, postgraduate student 2 year, Ufa state aviation technical University.

**KORZNIKOVA, Elena Alexandrovna**, Professor, Ufa state aviation technical University.

**DMITRIEV, Sergey Vladimirovich**, Institute for Molecule and Crystal Physics, UFRC, RAS, Russia